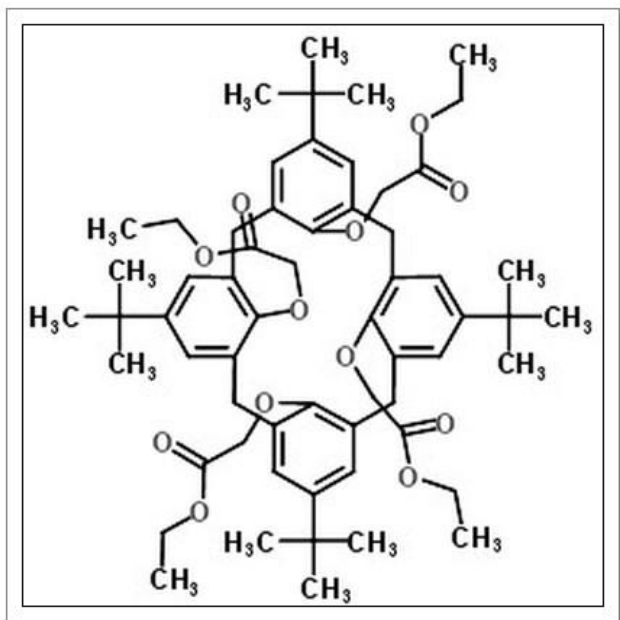


4-叔丁基杯[4]芳烃-四乙酸乙酯

4-tert-butylcalix[4]arene-tetraacetic acid tetraethyl ester



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | 4-tert-butylcalix[4]arene-tetraacetic acid tetraethyl ester |
| 中文名称 | 4-叔丁基杯[4]芳烃-四乙酸乙酯 |
| CAS 号 | 97600-39-0 |
| 分子式 | C60H80O12 |
| 分子量 | 993.27 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-叔丁基杯[4]芳烃-四乙酸乙酯 (CAS 号: 97600-39-0) 是一种杯芳烃衍生物, 分子式为 $C_{60}H_{80}O_{12}$, 分子量为 993.27。该化合物以杯[4]芳烃为骨架, 在 4 位引入叔丁基取代基, 并通过酯化反应在杯芳烃下缘引入四个乙酸乙酯基团。其纯度高于 96%, 具有典型的杯芳烃三维空腔结构, 能够通过主客体相互作用选择性结合特定分子或离子, 表现出优异的分子识别能力。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在超分子化学领域具有重要价值。其独特的空腔结构可充当人工受体, 与金属离子、有机小分子或生物分子形成稳定的包合物。乙酸乙酯基团的引入增强了其溶解性和功能化潜力, 使其在离子传输、分子传感和催化等领域表现出广泛应用前景。此外, 其叔丁基修饰可进一步提高空腔的疏水性和空间位阻效应, 优化选择性结合性能。

3. 主要应用领域与具体用途

4-叔丁基杯[4]芳烃-四乙酸乙酯主要用于以下领域:

- 超分子化学研究: 作为模型化合物研究主客体相互作用机制。
- 离子选择性电极: 修饰电极表面用于特定离子 (如碱金属或重金属离子) 的检测。
- 药物载体: 利用空腔结构包载疏水性药物分子, 改善溶解性和靶向性。
- 功能材料前体: 通过水解酯基进一步衍生化, 制备具有吸附或分离功能的聚合物材料。

4. 储存条件与使用建议

该产品需避光保存于干燥、阴凉处, 建议储存温度为 2-8°C。开封后应充入惰性气体保护, 防止吸湿和氧化。使用时需在干燥环境下操作, 避免与强酸、强碱或氧化剂直接接触。溶解性测试表明其易溶于氯仿、二氯甲烷等有机溶剂, 可据此选择适当溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 >96%，并提供核磁共振（NMR）和质谱（MS）表征数据。安全信息提示：该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护手套和护目镜。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。详细安全数据可参考提供的材料安全数据表（MSDS）。